

【補助事業概要の広報資料】

補助事業番号 26-124
補助事業名 平成26年度 炭素繊維の圧縮・せん断強度計算 補助事業
補助事業者名 愛媛大学大学院理工学研究科 教授 岡本 伸吾

1 補助事業の概要

(1) 事業の目的

炭素繊維を用いたCFRP（炭素繊維強化樹脂、Carbon Fiber Re-inforced Plastics）からなる構造物は軽量で高強度であるため、航空機、自転車、自動車などの輸送機器の機体や車体に用いられている。炭素繊維は、引張強度が大きい（繊維の軸方向の引張りに強い）ことは周知の事実であるが、圧縮強度やせん断強度は引張強度に比して低いと言われている。従って、CFRP構造物では、炭素繊維にできるだけ引張力が働き、圧縮力やせん断力が働かないように設計・製造される。しかしながら、複雑な構造物では、構造物のどこかに圧縮力やせん断力が働くことになる。このような場合には、炭素繊維の高い引張特性を有効に活用することができない。本研究の結果、高圧縮強度・高せん断強度炭素繊維の構造が解明できれば、材料設計に関してより明確な指針を得ることができる。

(2) 実施内容

<http://www.me.ehime-u.ac.jp/labo/kikaisys/robins/outline/tank.html>

① 圧縮・せん断に関するポテンシャル関数の構築

分子動力学（MD）法において、材料の機械的特性予測の成否を左右するポテンシャル関数の、圧縮およびせん断における精度を検証した。既存のポテンシャル関数であるREBOポテンシャルおよび Tersoffポテンシャルについて、ラフェンあるいはグラファイト単結晶の圧縮およびせん断のMD計算を行い、弾性率と強度を推算した。検証の結果、Tersoffポテンシャルが精度および計算速度の点で優れていることから、炭素繊維の圧縮・せん断のMD計算におけるポテンシャルとして採用することとした。

② 構造モデルの検証

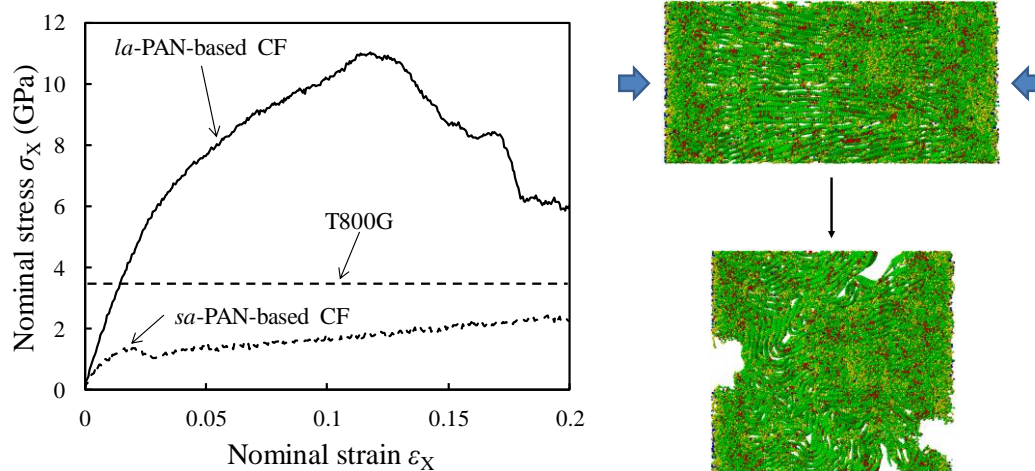
結晶子とアモルファス構造からなるPAN系炭素繊維のモデルを用いて、引張り中の結晶子の変形を解析した。X線回折シミュレーションを用いて、引張り中の結晶子のX線回折ピークの変化を調べ、結晶子の弾性率を推算した結果、これまでに報告されている実験結果とよく一致することを確認した。

③ 圧縮・せん断特性支配因子の解明

PAN系炭素繊維の構造モデルを用い、圧縮のMD計算を行って、圧縮強度を推算した。炭素繊維の基本構造であるグラファイト結晶は sp^2 炭素のみから成るが、本モデルでは、アニリングのMD計算を行って、 sp^3 炭素を含むアモルファス構造を成長させることにより結晶部とアモルファス部が混在した現実の炭素繊維の構造を再現している。アニール温度

を変えて、 sp^3 炭素量の異なる 3 種類のモデルを作成し、圧縮計算を行って sp^3 炭素量が圧縮強度に与える影響を調べた。

また、せん断変形の MD 計算を行い、PAN 系炭素繊維のせん断強度を明らかにした。



la-PAN-based CF: アニール処理あり, sp^3 炭素11%

sa-PAN-based CF: アニール処理なし, sp^3 炭素0%

図 1 PAN系炭素繊維の圧縮の応力-歪線図 図 2 圧縮過程の構造

2 予想される事業実施効果

本研究により、炭素繊維の引張特性に加えて、圧縮およびせん断特性へのナノ構造の影響が明らかになってきた。これにより、機械特性に関して総合的な設計指針が得られつつある。今後は得られた知見を活かして、高強度炭素繊維の製造方法につなげていくことが必要と考えられる。

3 補助事業に係る成果物

(1) 補助事業により作成したもの

<http://www.me.ehime-u.ac.jp/labo/kikaisys/robins/research/index.html>

【論文・学会発表】

- ① Ito, A., Okamoto, S., Molecular Dynamics Study on the Effect of Defects upon Shear Properties of Graphene, Engineering Letters, Vol. 22, Issue 2, (2014), pp. 87-93.
- ② Okamoto, S., Ito, A., Effect of Nitrogen Atoms and Grain Boundaries on Shear Properties of Graphene by Molecular Dynamics Simulations, Engineering Letters, Vol. 22, Issue 3, (2014), pp. 142-148.
- ③ Okamoto, S., Ito, A., Compressive Strength of PAN-based Carbon Fibers Using Molecular Dynamics Simulations, International Conference on Nanoscience and Nanotechnology (ICNSNT), Sri Lanka, (2014).

- ④ Ito, A., Okamoto, S., Defect Evaluation of PAN-based Carbon Fibers Using Lifetime Spectroscopy with Positron Annihilation and Molecular Dynamics Simulations, International Conference on Nanoscience and Nanotechnology(ICNSNT), Sri Lanka, (2014).
- ⑤ Okamoto, S., Ito, A., Molecular Dynamics Analysis on Compressive Strength of PAN-Based Carbon Fibers, International Journal of Nanoscience, Vol. 13, No.3, (2014), pp.1440004-1 - 1440004-11.
- ⑥ Ito, A., Okamoto, S., Atomistic structure of a PAN-based carbon fibre constructed by molecular dynamics simulations and lifetime measurement of positron annihilation, International Journal of Sustainable Aviation, accepted.
- ⑦ 伊藤明彦, 岡本伸吾, 陽電子消滅法 と分子動力学法 を用いた PAN系炭素繊維の分子モデリングと引張強度, 第28回分子シミュレーション討論会, 仙台, (2014).
- ⑧ 岡本伸吾, 伊藤明彦, PAN系炭素繊維の圧縮破壊の発生メカニズムと圧縮強度に関する分子動力学解析, 第28回分子シミュレーション討論会, 仙台, (2014).



図3 国際会議ICNSNTでの発表風景およびBest Presentation Award受賞式の記念撮影

(2)(1) 以外で当事業において作成したもの

【学会発表】

- ① 岡本伸吾, 炭素繊維の利用技術例(高圧複合容器の開発)および炭素繊維のナノ構造解析の重要性, 第9回CMSI産官学連続研究会「炭素繊維複合材料と分子シミュレーション」, 東京, (2014) (招待講演).
- ② 伊藤明彦, 分子動力学法を用いた炭素繊維の原子モデリングと引張・圧縮強度計算, 第9回CMSI産官学連続研究会「炭素繊維複合材料と分子シミュレーション」, 東京, (2014) (招待講演).

4 事業内容についての問い合わせ先

所属機関名: 愛媛大学(エヒメダイガク)

住所: 〒790-8577

愛媛県松山市文京町3番

申請者： 教授 岡本伸吾（オカモトシngo）

担当部署： 大学院工学研究科 生産環境工学専攻（ダイガクインリコウガクケンキュウカ セイサンカンキョウコウガクセンコウ）

E-mail : okamoto.shingo.mh@ehime-u.ac.jp

URL : <http://kenqweb.office.ehime-u.ac.jp/Profiles/0009/0002042/profile.html>